

APPROXIMATION NUMERIQUE ET OPTIMISATION

G. ALLAIRE

28 Août 2018

☞ **Approximation numérique:** amphis 1 à 6.

☞ **Optimisation:** amphis 7 à 10.

☞ **Site web du cours:**

http://www.cmap.polytechnique.fr/~allaire/cours_map411.html

☞ **Site web Moodle:**

<https://moodle.polytechnique.fr/course/view.php?id=6104>

☞ **Mes coordonnées:**

gregoire.allaire@polytechnique.fr

Introduction à la modélisation mathématique et à la simulation numérique

Les trois étapes des mathématiques appliquées:

- ☞ **Modélisation.**
- ☞ **Analyse du modèle.**
- ☞ **Simulation numérique.**

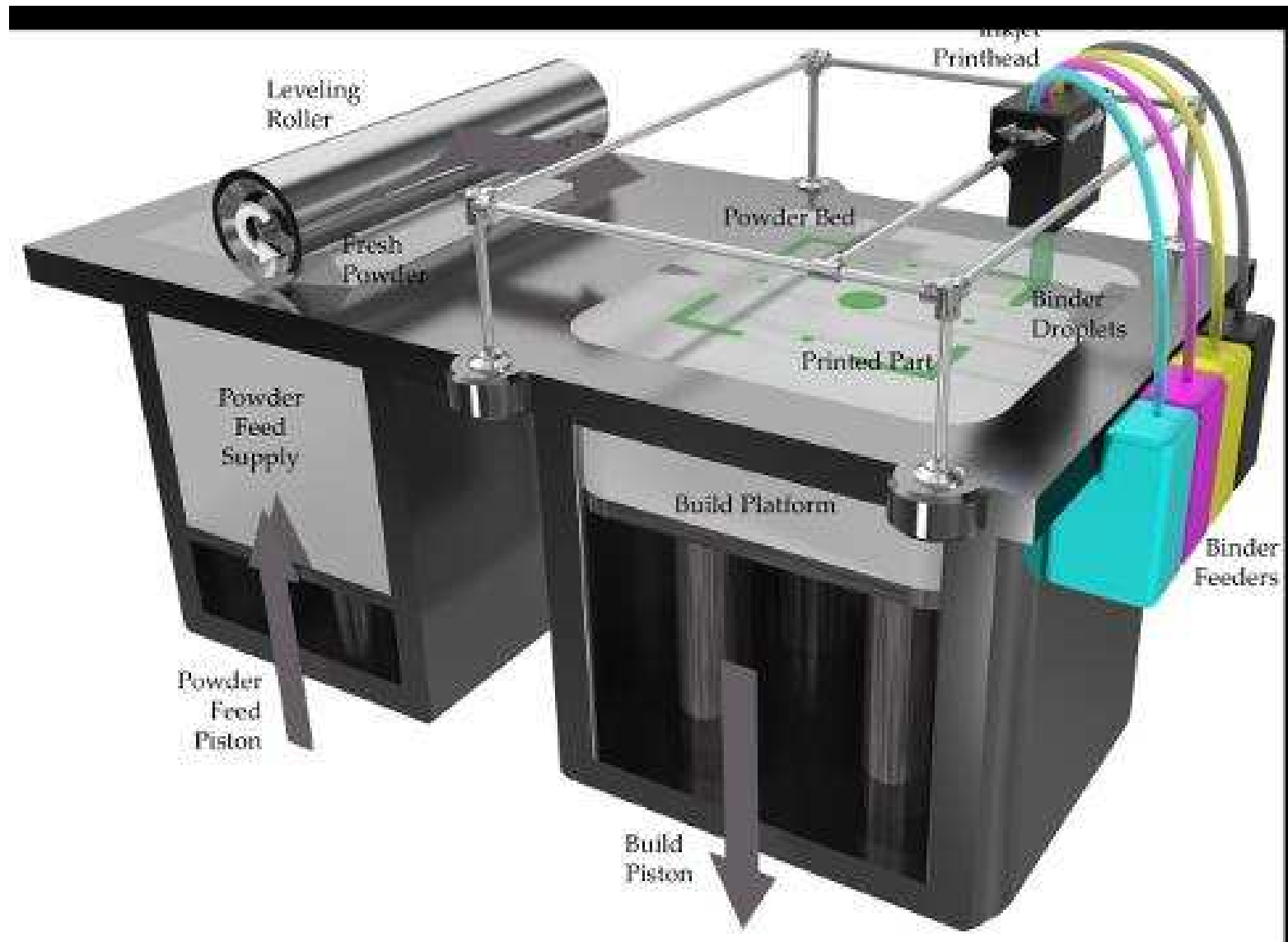
Domaines d'applications innombrables ! Quelques exemples:

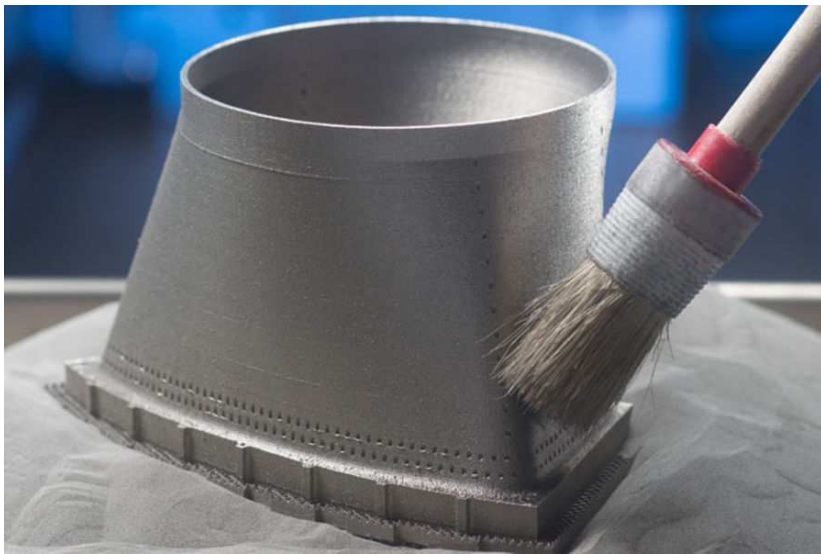
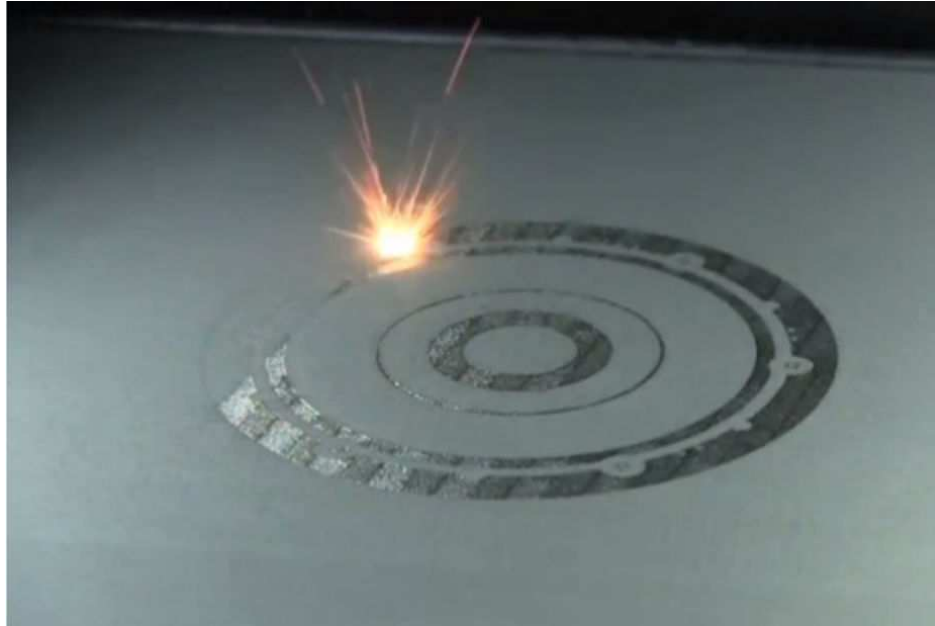
- ☞ Sciences de l'ingénieur: aérodynamique, calcul des structures, électromagnétisme, énergie, automatique, signal, finance...
- ☞ Autres sciences: physique, optique, chimie, biologie, économie...
- ☞ Enjeux sociétaux: climat, environnement...
- ☞ Chaque année de nouveaux problèmes arrivent !

Exemple: la fabrication additive

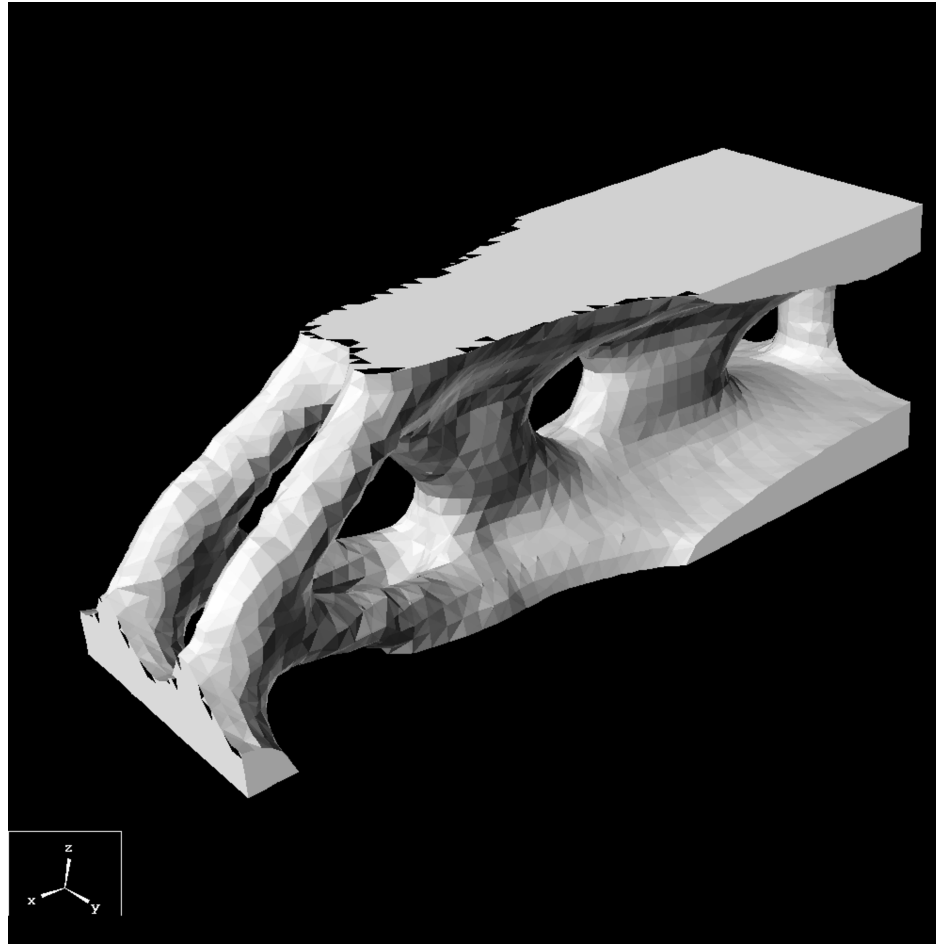


- ☞ Imprimantes 3-d.
- ☞ Pas cher et amusant pour l'impression en plastique...
- ☞ Beaucoup plus compliqué mais intéressant pour l'impression métallique !
- ☞ Permet des formes (optimisées) impossibles à construire autrement.
- ☞ Enorme besoin de [simulation numérique et d'optimisation](#) !



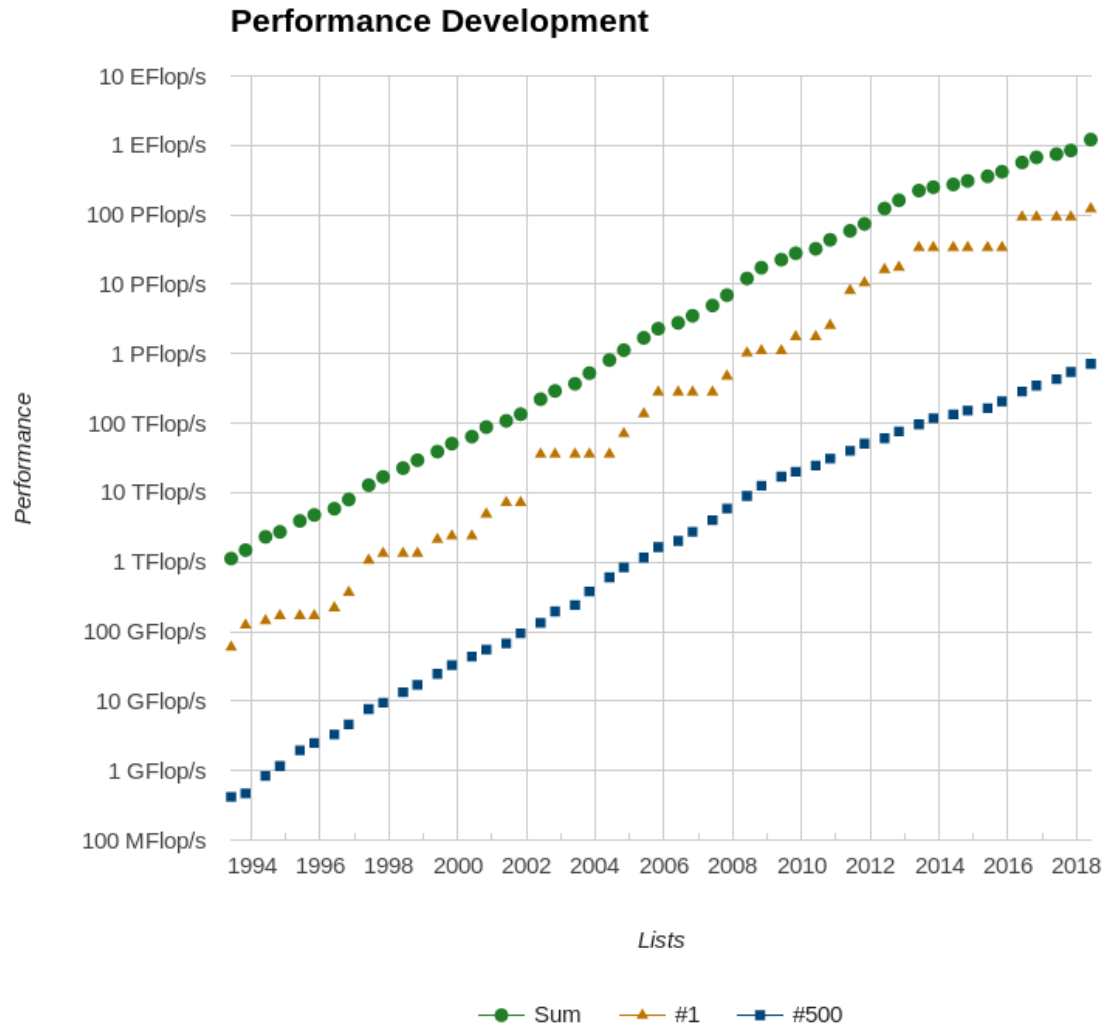


Exemple de simulation numérique et d'optimisation



Structure construite par fabrication additive: résoudre **l'équation de la chaleur** pour prédire les **contraintes thermiques résiduelles**.

Les Maths Applis “explorent” grâce au développement des ordinateurs.



Croissance exponentielle de la puissance des ordinateurs.

- 1976 - Cray 1 (USA): 133 Mflops
- 1993 - Thinking Machine CM5 (USA): 59,700 Mflops (59 Gflops)
- 2005-2006 - IBM BlueGene (USA): 280,600,000 Mflops (280 Tflops)
- 2008 - IBM Roadrunner : 1,105,000,000 Mflops (1 Pflops) 129,600 processeurs (de PlayStation !)
- 2011 - K computer (Japon): 10,510,000,000 Mflops (10.5 Pflops)
- 2015 - Tianhe-2 (Chine): 33,860,000,000 Mflops (33.8 Pflops)
- 2018 - Summit - IBM (USA): 122,300,000,000 Mflops (122 Pflops), 2 millions de processeurs, consommation électrique 8,8 MW !

Loi de Moore (variante): la puissance triple tous les deux ans.

Objectifs du cours

Acquérir les (premiers) outils mathématiques pour

- ☞ **réaliser, comprendre et interpréter des simulations numériques,**
- ☞ **optimiser ou commander des modèles ou des systèmes.**

A quoi ça sert ?

- ⇒ **Prévisions:** météo, environnement, sureté...
- ⇒ **Conception et optimisation:** crash test en automobile, soufflerie numérique pour l'aérodynamique, prospection et exploitation pétrolière, antennes, aide à la décision...
- ⇒ **Expérimentation:** validation d'un modèle, vérification d'une théorie...

Les mathématiques sont devenues une science expérimentale !

Avertissements

- ⇒ Ne jamais oublier de **valider** un calcul !
- ⇒ **Attention aux belles images** sans signification !
- ⇒ La simulation numérique est souvent **complémentaire** de l'expérimentation physique.
- ⇒ Dans ce cours: **modèles déterministes.**

Buts de cette leçon

- ⇒ Expliquer brièvement ce qu'est la modélisation.
- ⇒ Introduire la méthode des différences finies.
- ⇒ Présenter quelques idées de base du calcul numérique.
- ⇒ Montrer que les aspects théoriques et pratiques forment un tout !
- ⇒ Montrer l'utilité des mathématiques appliquées !
- ⇒ Faire une rapide introduction à l'optimisation.

Remarque: on reste assez formel dans l'analyse (voir les prochaines leçons pour un formalisme plus rigoureux).

Exemple de modélisation

Convection et diffusion de la chaleur.

Notations. Inconnue \equiv température $\theta(t, x)$.

\Rightarrow Variables de temps $t \in \mathbb{R}^+$ et d'espace $x \in \mathbb{R}^N$.

\Rightarrow Dérivée partielle en temps: $\frac{\partial \theta}{\partial t}$

\Rightarrow Gradient en espace: $\nabla \theta = \left(\frac{\partial \theta}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial \theta}{\partial x_N} \right)^T$

\Rightarrow Divergence d'un vecteur $q = (q_1, \dots, q_N)^T$: $\operatorname{div} q = \sum_{i=1}^N \frac{\partial q_i}{\partial x_i}$

\Rightarrow Laplacien: $\Delta \theta = \operatorname{div}(\nabla \theta) = \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_i^2}$

Conservation (ou bilan) de l'énergie

Grandeurs physiques: température θ , flux de chaleur q (un vecteur), sources thermiques f , chaleur spécifique $c > 0$ (une constante).

Bilan dans un volume élémentaire V (indépendant du temps):

Variation en temps = sources + pertes ou entrées à travers les parois

$$\frac{d}{dt} \left(\int_V c \theta dx \right) = \int_V f dx - \int_{\partial V} q \cdot n ds.$$

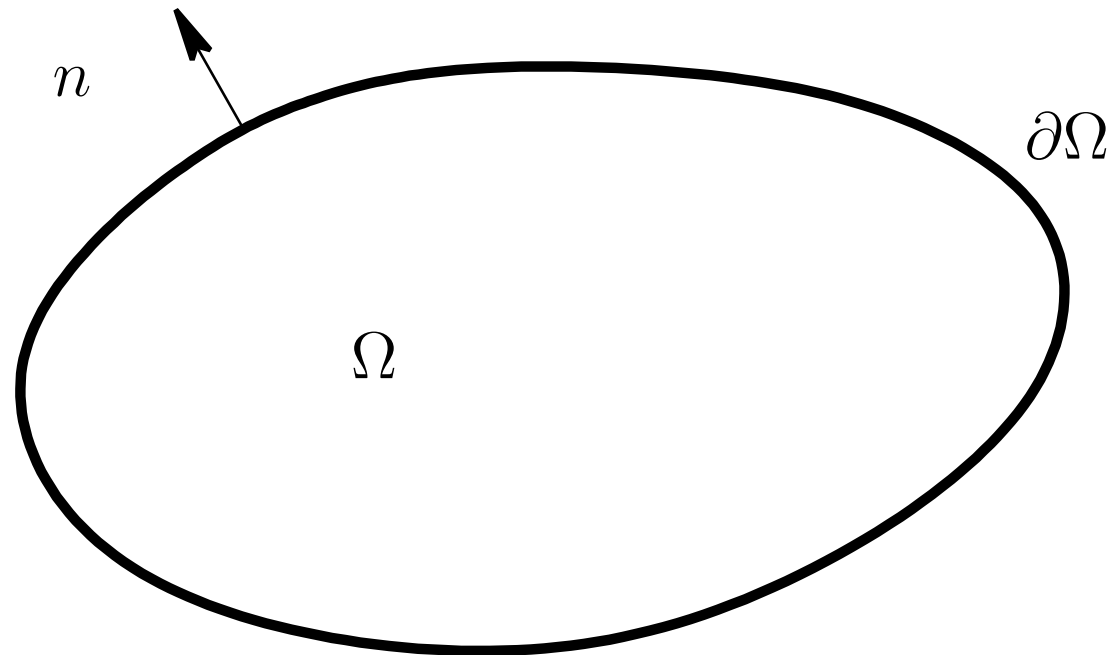
Par application du théorème de Gauss on obtient

$$\int_{\partial V} q \cdot n ds = \int_V \operatorname{div} q dx.$$

On permute la dérivée en temps et l'intégrale sur V . Comme le volume V est quelconque, on en déduit

$$c \frac{\partial \theta}{\partial t} + \operatorname{div} q = f$$

Normale unité d'un ouvert



Convention: normale extérieure !

Normale unité: $\|n\| = 1$.

Loi constitutive (dite de Fourier ou de Fick)

Grandeurs physiques: vitesse convective V , conductivité thermique $k > 0$.

$$q(t, x) = cV\theta(t, x) - k\nabla\theta(t, x)$$

Relation linéaire entre le flux à travers une surface et la **convection** suivant la vitesse plus la **diffusion** suivant l'opposé du gradient thermique.

Relations supplémentaires:

Condition initiale: $\theta(t = 0, x) = \theta_0(x)$.

Conditions aux limites:

- ☞ Dirichlet: $\theta = 0$ sur le bord (**thermostat**).
- ☞ Neumann: $q \cdot n = 0$ (**adiabatique**).

Modèle de convection-diffusion

On trouve une équation aux dérivées partielles:

$$\left\{ \begin{array}{ll} c \frac{\partial \theta}{\partial t} + c V \cdot \nabla \theta - k \Delta \theta = f & \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ \theta = 0 & \text{sur } \partial \Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ \theta(t = 0, x) = \theta_0(x) & \text{dans } \Omega \end{array} \right.$$

⇒ **Données:** $c, V, k, f(t, x), \theta_0(x)$, et Ω .

⇒ **Inconnue:** $\theta(t, x)$.

⇒ Modèle issu d'une loi de conservation et d'une loi constitutive.

⇒ Modèle simplifié dont l'analyse montrera les limites !

Modélisation (encore !)

Balance entre le terme de convection et le terme de diffusion mesurée par une grandeur sans dimension, le **nombre de Péclet**

$$\text{Pe} = \frac{cVL}{k},$$

où L est une longueur caractéristique du problème (par exemple le diamètre du domaine Ω).

Simplifications possibles du modèle:

$\text{Pe} \ll 1 \Rightarrow$ équation de la chaleur

$\text{Pe} \gg 1 \Rightarrow$ équation d'advection

On a donc **trois modèles** parmi lesquels il faut savoir choisir.

Modèles simplifiés

Equation de la chaleur ($Pe = 0$)

$$\left\{ \begin{array}{ll} c \frac{\partial \theta}{\partial t} - k \Delta \theta = f & \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ \theta = 0 & \text{sur } \partial \Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ \theta(t = 0, x) = \theta_0(x) & \text{dans } \Omega \end{array} \right.$$

Equation d'advection ($Pe = +\infty$)

$$\left\{ \begin{array}{ll} c \frac{\partial \theta}{\partial t} + c V \cdot \nabla \theta = f & \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ \theta = 0 & \text{sur } \{x \in \partial \Omega \text{ tel que } V \cdot n(x) < 0\} \times \mathbb{R}_*^+ \\ \theta(t = 0, x) = \theta_0(x) & \text{dans } \Omega \end{array} \right.$$

Solutions explicites

Hypothèses: dimension $N = 1$, $\Omega = \mathbb{R}$ (pas de conditions aux limites), source $f = 0$. On pose $\nu = k/c$. **Faites le calcul pour vérifier !**

Equation de convection-diffusion:

$$\theta(t, x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\nu t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \theta_0(y) \exp\left(-\frac{(x - Vt - y)^2}{4\nu t}\right) dy.$$

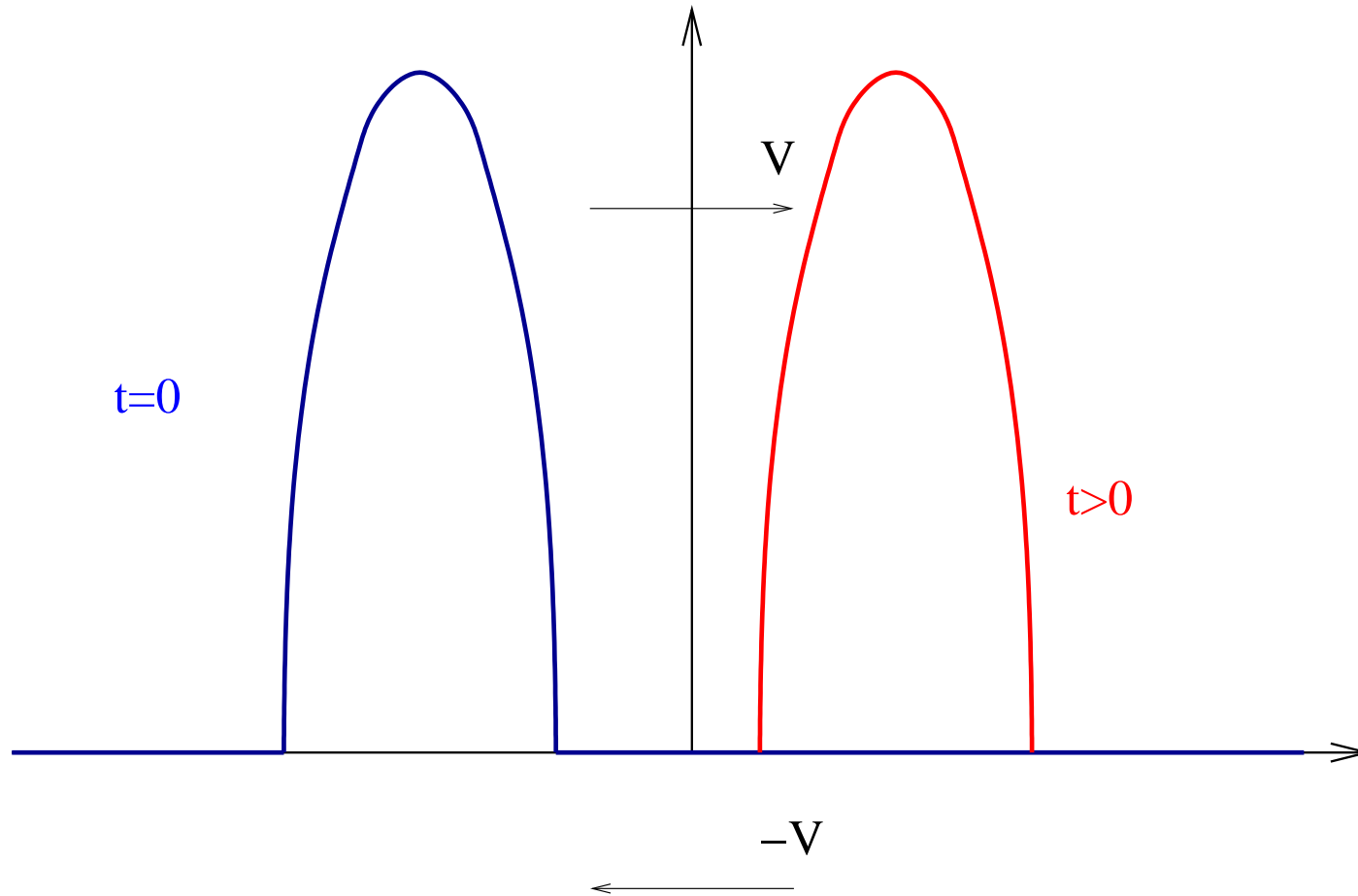
Equation de la chaleur:

$$\theta(t, x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\nu t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \theta_0(y) \exp\left(-\frac{(x - y)^2}{4\nu t}\right) dy.$$

Equation d'advection:

$$\theta(t, x) = \theta_0(x - Vt).$$

Propriété de la solution explicite de l'équation de convection



Principe du maximum pour la solution $\theta(t, x) = \theta_0(x - Vt)$:

$$\min \theta_0 \leq \theta(t, x) \leq \max \theta_0$$

Propriété des solutions de la chaleur et de convection-diffusion

Principe du maximum encore pour les solutions explicites des équations de la chaleur et de convection-diffusion.

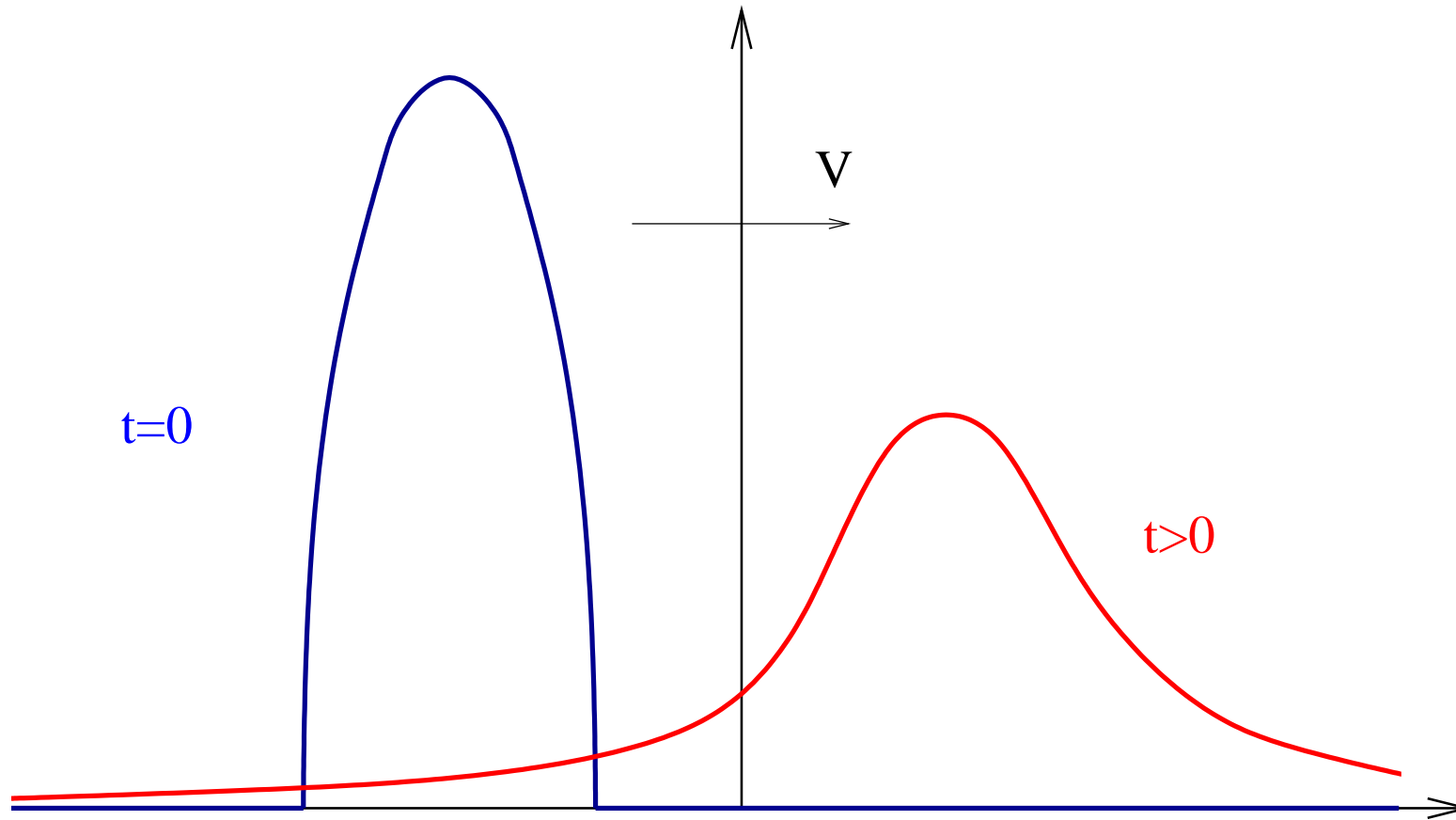
Solution = donnée initiale **moyennée** par un noyau gaussien:

$$\frac{1}{\sqrt{4\pi\nu t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{(x - Vt - y)^2}{4\nu t}\right) dy = 1.$$

Faites le calcul pour vérifier !

Vitesse infinie de propagation ! Pour les équations de la chaleur et de convection-diffusion, si $\theta_0(x) \geq 0$ et $\theta_0 \neq 0$, alors $\theta(t, x) > 0$ pour tout $t > 0$.

Solution de l'équation de convection-diffusion



Convolution de la donnée initiale avec un noyau gaussien

Analyse des modèles

Au vu des solutions explicites:

☞ **Principe du maximum** pour les trois modèles:

$$\min_{x \in \mathbb{R}} \theta_0(x) \leq \theta(x, t) \leq \max_{x \in \mathbb{R}} \theta_0(x) \quad \text{pour tout } (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+.$$

☞ **La “flèche” du temps:** l'équation d'advection est **réversible** en temps, tandis que l'équation de la chaleur (ou de convection-diffusion) est **irréversible**.

☞ **Vitesse de propagation:** finie pour l'équation d'advection, mais **infinie** pour l'équation de la chaleur (ou de convection-diffusion).

Remarques

- ☞ La même équation se retrouve dans d'autres problèmes: évolution de la concentration d'un polluant, évaluation du prix des options en finance, écoulement potentiel d'un fluide, électrostatique...
- ☞ Très nombreux autres modèles à base d'équations aux dérivées partielles.

Notion de problème bien posé

- **Problème aux limites** = équation aux dérivées partielles munie de conditions aux limites sur la totalité de la frontière du domaine.
- **Problème de Cauchy** = équation aux dérivées partielles où, pour la variable de temps t , les conditions “au bord” sont des conditions initiales (et pas finales).

Définition. On dit que le problème $\mathcal{A}(u) = f$ est **bien posé** au sens de Hadamard si pour toute donnée f il admet une solution unique u , et si cette solution u dépend continuellement de la donnée f .

Condition nécessaire pour faire du calcul numérique !

Des petites variations de f (erreurs de mesures ou d'arrondis) ne doivent entraîner que des petites variations de u .

Un peu de vocabulaire

⇒ Exemple d'équation **parabolique**: équation de la chaleur

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \theta}{\partial t} - \Delta \theta = f \quad \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ + \text{conditions aux limites} + \text{condition initiale} \end{array} \right.$$

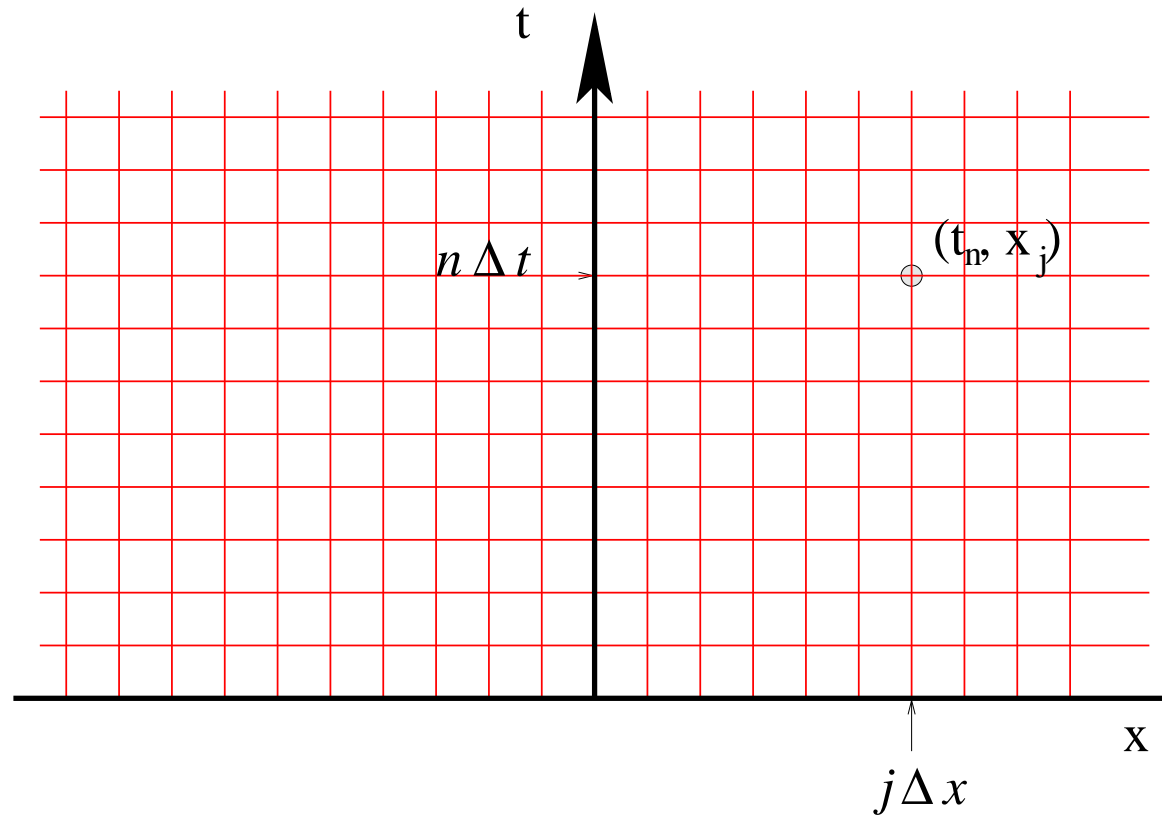
⇒ Exemple d'équation **elliptique**: équation de Laplace

$$\left\{ \begin{array}{l} -\Delta \theta = f \quad \text{dans } \Omega \\ + \text{conditions aux limites} \end{array} \right.$$

⇒ Exemple d'équation **hyperbolique**: équation des ondes

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} - \Delta \theta = f \quad \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ + \text{conditions aux limites} + \text{conditions initiales} \end{array} \right.$$

Différences finies



Maillage: discrétisation de l'espace et du temps

$$(t_n, x_j) = (n\Delta t, j\Delta x) \quad \text{pour } n \geq 0, j \in \mathbb{Z}$$

$\Delta t =$ pas de temps, $\Delta x =$ pas d'espace (supposés "petits").

Principe des différences finies

On calcule des **approximations**

$$u_j^n \approx u(t_n, x_j)$$

On remplace les dérivées par des **différences finies**

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t_n, x_j) \approx \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} \quad \text{ou bien} \quad \approx \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} \quad \text{ou bien} \quad \approx \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x}$$

Principe de discrétisation:

on remplace un problème de dimension **infinie** (calculer la fonction $u(t, x)$) par un problème de dimension **finie** (calculer les valeurs discrètes u_j^n), qui seul peut être résolu par un ordinateur.

Différences divisées et formules de Taylor

Il n'y a pas **unicité** des formules d'approximation par différences finies.

On utilise des **formules de Taylor**. Par exemple

$$\begin{aligned}
 -u(t, x - \Delta x) + 2u(t, x) - u(t, x + \Delta x) = & -(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) \\
 & - \frac{(\Delta x)^4}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(t, x) + \mathcal{O}\left((\Delta x)^6\right)
 \end{aligned}$$

On en déduit la formule centrée (en espace)

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t_n, x_j) \approx \frac{-u_{j-1}^n + 2u_j^n - u_{j+1}^n}{(\Delta x)^2}$$

à un terme d'ordre $(\Delta x)^2$ près.

Approximation de la dérivée en temps

Trois possibilités:

⇒ Différence finie **centrée** en temps:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t_n, x_j) \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t}$$

⇒ Différence finie décentrée (on avance dans le temps): **Euler explicite**

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t_n, x_j) \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}$$

⇒ Différence finie décentrée (on remonte dans le temps): **Euler implicite**

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t_n, x_j) \approx \frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t}$$

Application à l'équation de la chaleur

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial u}{\partial t} - \nu \Delta u = 0 & \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ u(t = 0, x) = u_0(x) & \text{dans } \Omega \end{array} \right.$$

avec $\nu = \frac{k}{c} > 0$.

Pour simplifier: dimension $N = 1$ et $\Omega = \mathbb{R}$.

Nous allons faire des **expériences numériques**.

But:

montrer qu'il y a quelque chose à comprendre...

Trois schémas pour l'équation de la chaleur

⇒ schéma centré: le plus "naturel"

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1}^n + 2u_j^n - u_{j+1}^n}{(\Delta x)^2} = 0$$

⇒ schéma d'Euler explicite: le plus simple

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1}^n + 2u_j^n - u_{j+1}^n}{(\Delta x)^2} = 0$$

(explicite \Leftrightarrow formule immédiate pour trouver u^{n+1} en fonction de u^n)

⇒ schéma d'Euler implicite: plus compliqué

$$\frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1}^n + 2u_j^n - u_{j+1}^n}{(\Delta x)^2} = 0$$

(implicite \Leftrightarrow système linéaire pour trouver u^n en fonction de u^{n-1})

Initialisation: $u_j^0 = u_0(x_j)$ où $u_0(x)$ est la condition initiale.

Données des expériences numériques

- ☞ Pas de terme source $f = 0$, ni de convection $V = 0$.
- ☞ Coefficient de diffusion $\nu = 1$.
- ☞ Domaine $\Omega =] - 10; +10[$.
- ☞ Condition aux limites de Dirichlet $u(-10) = u(+10) = 0$.
- ☞ Donnée initiale

$$u_0(x) = \max(1 - x^2, 0).$$

- ☞ Comme $\Omega \approx \mathbb{R}$ on compare avec la solution exacte dans \mathbb{R}

$$u(t, x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\nu t}} \int_{-\infty}^{+\infty} u_0(y) \exp\left(-\frac{(x-y)^2}{4\nu t}\right) dy.$$

Trois schémas pour l'équation de la chaleur

⇒ schéma centré: instable et inutilisable !

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1}^n + 2u_j^n - u_{j+1}^n}{(\Delta x)^2} = 0$$

⇒ schéma d'Euler explicite: stable sous condition

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1}^n + 2u_j^n - u_{j+1}^n}{(\Delta x)^2} = 0$$

⇒ schéma d'Euler implicite: toujours stable

$$\frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1}^n + 2u_j^n - u_{j+1}^n}{(\Delta x)^2} = 0$$

Condition de stabilité

Stabilité \Leftrightarrow pas d'oscillations numériques (définition précise au prochain chapitre).

Observations numériques: on fixe Δx et on fait varier Δt .

- ☞ Schéma centré: toujours instable.
- ☞ Schéma implicite: toujours stable.
- ☞ Schéma explicite: stable sous la condition CFL (Courant, Friedrichs, Lewy ; 1928 !)

$$2\nu\Delta t \leq (\Delta x)^2.$$

Le pas de temps ne peut pas être trop grand !

Condition de stabilité (suite)

Justification mathématique de la condition CFL de stabilité pour le schéma explicite.

Principe du maximum discret: le schéma explicite est équivalent à

$$u_j^{n+1} = \frac{\nu\Delta t}{(\Delta x)^2} u_{j-1}^n + \left(1 - 2\frac{\nu\Delta t}{(\Delta x)^2}\right) u_j^n + \frac{\nu\Delta t}{(\Delta x)^2} u_{j+1}^n$$

u_j^{n+1} est une **combinaison convexe** si la condition CFL est satisfaite.

Donc, si $2\nu\Delta t \leq (\Delta x)^2$, on a

$$m \leq u_j^0 \leq M \quad \forall j \in \mathbb{Z} \quad \Rightarrow \quad m \leq u_j^n \leq M \quad \forall j \in \mathbb{Z} \text{ et } \forall n \geq 0.$$

Si la condition CFL n'est pas satisfaite, il y a instabilité. Exemple:

$$u_j^0 = (-1)^j \quad \Rightarrow \quad u_j^n = (-1)^j \left(1 - 4\frac{\nu\Delta t}{(\Delta x)^2}\right)^n$$

qui tend (en valeur absolue) vers ∞ car $2\nu\Delta t > (\Delta x)^2 \Rightarrow 1 - 4\frac{\nu\Delta t}{(\Delta x)^2} < -1$.

Conclusion 1

Pour certains schémas il existe une condition, dite CFL, qui est nécessaire et suffisante pour la stabilité.

Autrement dit, pour certains schémas le pas de temps Δt doit être petit en comparaison au pas d'espace Δx .

Expériences numériques pour la convection-diffusion

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial u}{\partial t} + V \cdot \nabla u - \nu \Delta u = 0 & \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ u(t = 0, x) = u_0(x) & \text{dans } \Omega \end{array} \right.$$

Schéma explicite en temps, centré en espace. Mêmes données que précédemment avec $\nu \Delta t = 0.4(\Delta x)^2$ et $V = 1$.

1. $\nu = 1$
2. $\nu = 0.1$
3. $\nu = 0.01$

De plus en plus instable !

Conclusion 2

La condition CFL varie d'une équation à une autre.

Quand la vitesse de convection domine le coefficient de diffusion (**grand nombre de Péclet**) il faut trouver une autre condition CFL.

Expériences numériques pour l'advection

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + V \cdot \nabla u = 0 & \text{dans } \mathbb{R} \times \mathbb{R}_*^+ \\ u(t = 0, x) = u_0(x) & \text{dans } \Omega \end{cases}$$

Solution explicite: $u(x, t) = u_0(x - Vt)$.

1. Schéma explicite **centré**

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + V \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0.$$

Instable quelque soit le choix de Δt !

2. Schéma explicite **décentré amont**

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + V \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0 \quad \text{si } V > 0.$$

On va chercher l'information en **remontant le courant** (une des idées majeures de l'analyse numérique).

Stabilité du schéma décentré amont

Le schéma explicite décentré amont est stable sous une nouvelle condition CFL

$$|V|\Delta t \leq \Delta x.$$

Justification mathématique: on peut le réécrire sous la forme

$$u_j^{n+1} = \frac{V\Delta t}{\Delta x} u_{j-1}^n + \left(1 - \frac{V\Delta t}{\Delta x}\right) u_j^n,$$

qui est une combinaison convexe si $|V|\Delta t \leq \Delta x$, donc il vérifie un **principe du maximum discret**.

Conclusion 3

Tous les schémas ne fonctionnent pas, même s'ils ont l'air raisonnables !

Il faut faire appel à la physique du problème et à l'analyse mathématique pour trouver de **bons schémas**.

Dans le cas présent, l'idée clé est le **décentrement amont**.

Constats et objectifs

- ☞ Le calcul numérique n'est pas toujours simple !
- ☞ Il existe des notions importantes: condition CFL pour la stabilité, décentrement des schémas, etc.
- ☞ On a besoin de l'analyse numérique pour sélectionner les “bons” schémas numériques.
- ⇒ Apprendre à bien utiliser les schémas numériques.
- ⇒ Pouvoir en concevoir de nouveaux.
- ⇒ Connaitre les bases théoriques indispensables.
- ⇒ A court terme (deux prochains amphis): *stabilité, précision, et convergence des schémas de différences finies.*

Introduction à l'optimisation

- ☞ **Enorme** champ d'applications !
- ☞ Beaucoup de disciplines **connexes**: calcul des variations, commande optimale, problèmes inverses, recherche opérationnelle, traitement des données...
- ☞ Nombreux liens avec l'approximation numérique.
- ☞ Aujourd'hui: **présentation de quelques exemples.**

Minimisation d'une énergie

Pour calculer la solution de l'équation de Laplace

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{dans } \Omega \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases}$$

on peut **minimiser une énergie** (mécanique pour une membrane, électrostatique pour un conducteur) $J(v)$ définie par

$$J(v) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx - \int_{\Omega} f v dx.$$

Autrement dit, la résolution du problème aux limites est équivalente à la résolution du problème de minimisation

$$\min_{v \in V_0} J(v)$$

avec $V_0 = \{ \phi \in C^1(\overline{\Omega}) \text{ tel que } \phi = 0 \text{ sur } \partial\Omega \}$.

C'est un exemple de **calcul des variations**.

Minimisation d'une énergie discrétisée

Après discrétisation (par différences finies ou éléments finis), résoudre l'équation de Laplace revient à résoudre un **système linéaire**.

$$Ax = b$$

où A est une matrice symétrique, définie positive, de taille $n \times n$.

Résoudre $Ax = b$ est équivalent à **minimiser une énergie**

$$\min_{x \in \mathbf{R}^n} \frac{1}{2} Ax \cdot x - b \cdot x$$

Certaines méthodes numériques (algorithme du gradient conjugué) de résolution des systèmes linéaires utilisent ce problème de minimisation.

Problèmes en algèbre linéaire

Moindres carrés. Si A est une matrice quelconque de taille $p \times n$, alors une manière de résoudre approximativement $Ax \approx b$, avec $b \in \mathbb{R}^p$ et $x \in \mathbb{R}^n$, est de minimiser au sens “des moindres carrés”,

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|^2$$

On peut rajouter des **contraintes** qui sont utiles en signal ou traitement des données. Par exemple, $\sum_{i=1}^n |x_i| \leq c$ pour obtenir des solutions “creuses”.

Première valeur propre. Soit A une matrice carrée d'ordre n , symétrique. On calcule sa **première valeur propre** en minimisant

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n, \|x\|=1} Ax \cdot x.$$

On peut calculer les premières valeurs propres et vecteurs propres de A^*A pour obtenir une approximation de petit rang de A .

Consommation des ménages

Modèle classique en économie. On considère un ménage qui peut consommer n types de marchandise pour maximiser sa satisfaction ou son utilité, sous une contrainte de budget maximal.

- ⇒ $p_i \geq 0$ prix de la marchandise, $1 \leq i \leq n$,
- ⇒ $x_i \geq 0$ quantité de la marchandise, $1 \leq i \leq n$,
- ⇒ fonction d'utilité, croissante et concave, $u(x)$ de \mathbb{R}_+^n dans \mathbb{R} ,
- ⇒ budget maximal du ménage $b > 0$.

La consommation du ménage sera le vecteur x^* qui réalisera le maximum de

$$\max_{x \in \mathbb{R}_+^n, x \cdot p \leq b} u(x).$$

Problème de transport

Exemple de programme linéaire. Le but est d'optimiser la livraison d'une marchandise entre entrepôts et clients.

- ⇒ M entrepôts avec des stocks s_i , $1 \leq i \leq M$,
- ⇒ N clients ayant commandé r_j , $1 \leq j \leq N$,
- ⇒ coût de transport unitaire c_{ij} entre l'entrepôt i et le client j ,
- ⇒ variables de décision = quantités v_{ij} de marchandise partant de i vers j .

Autrement dit, on veut résoudre le problème de minimisation

$$\min_{(v_{ij})} \left(\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N c_{ij} v_{ij} \right)$$

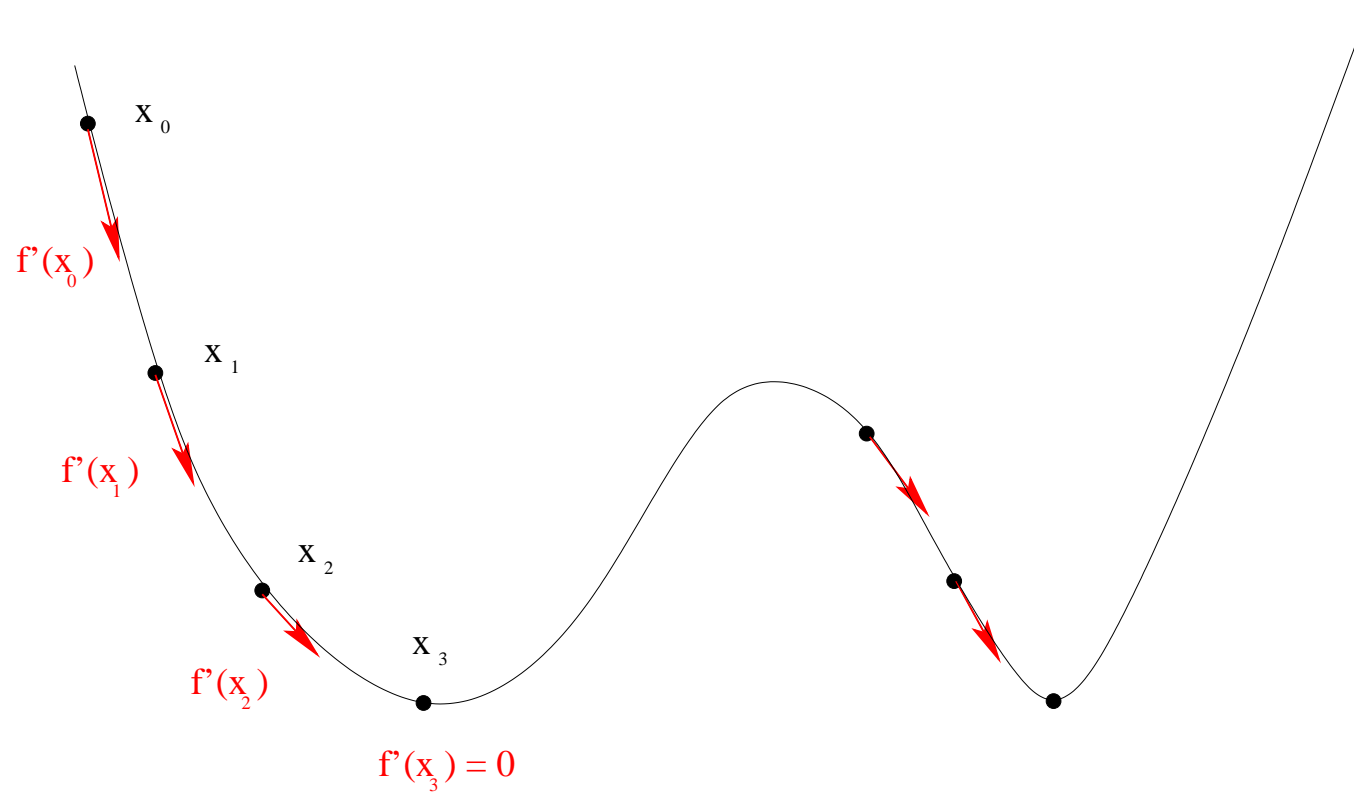
sous les contraintes de limites des stocks et de satisfaction des clients

$$v_{ij} \geq 0, \quad \sum_{j=1}^N v_{ij} \leq s_i, \quad \sum_{i=1}^M v_{ij} = r_j \quad \text{pour } 1 \leq i \leq M, \quad 1 \leq j \leq N.$$

Algorithme numérique d'optimisation

Si on connaît la dérivée de la fonction $f(x)$, on peut minimiser (numériquement) cette fonction par **l'algorithme du gradient** (ou de la plus grande pente)

$$x_{n+1} = x_n - \delta f'(x_n) \quad \text{avec } 0 < \delta \ll 1.$$



Buts du cours en optimisation

- ✎ Etudier l'existence de solutions de problèmes d'optimisation.
- ✎ Etablir des conditions d'optimalité, tenant compte des contraintes.
- ✎ **Calculer les dérivées des fonctions objectifs et des contraintes.**
- ✎ Etudier des **algorithmes numériques d'optimisation** (à base de gradient).

Conclusion

- ⇒ Profonde interaction entre motivations physiques, modélisation mathématique, simulation numérique et optimisation.
- ⇒ **La simulation numérique et l'optimisation aident à la compréhension et à la conception !** Les mathématiques sont devenues une science expérimentale !

Travaux pratiques

Il y aura des travaux pratiques numériques lors des petites classes des mercredis 5, 12 et 26 septembre, 3 et 17 octobre.

Vous devez venir en petites classes avec votre ordinateur portable sur lequel sera préalablement installé le logiciel Python.

Vous êtes sensés connaître le fonctionnement de base du logiciel Python avant le début des travaux pratiques.

Mini-projets de simulation numérique

- ⇒ Mise en oeuvre informatique avec le logiciel Python. Voir les sujets proposés sur:
<https://moodle.polytechnique.fr/course/view.php?id=6104>
- ⇒ Faire des voeux sur le site de la DE <https://de.polytechnique.fr/> pour obtenir un sujet de **mini-projet de simulation numérique** par binôme **avant le mercredi 5 septembre**.
- ⇒ Pas plus de 16 binômes sur un même sujet. Pas de trinômes ou plus. L'attribution des sujets s'effectuera par l'algorithme de la DE...
- ⇒ Rendre un mini-rapport (un par binôme, pas plus de quelques pages avec les fichiers des programmes) sur le site web Moodle pour le **lundi 5 novembre 2018** au plus tard.
- ⇒ Prévoir de l'ordre d'une vingtaine d'heures de travail personnel de réflexion, de mise en oeuvre informatique et de rédaction.

Notation MAP 411

$$\text{Note} = \frac{1}{2}CC + \frac{1}{8} \max(DV1, CC) + \frac{1}{8} \max(DV2, CC) + \frac{1}{4}TP + (\text{bonus} \leq 2)$$

- ⇒ Bonus attribué par les enseignants de PC.
- ⇒ CC = contrôle classant.
- ⇒ TP = mini-projet de simulation numérique
- ⇒ DV1 = premier devoir obligatoire (distribué le 10 septembre, à rendre sur Moodle le 24 septembre, corrigé par des moniteurs).
- ⇒ DV2 = deuxième devoir obligatoire (distribué le 22 octobre, à rendre sur Moodle le 5 novembre, corrigé par des moniteurs).
- ⇒ Transformation de la note chiffrée en lettre par mes soins...

Pour du tutorat (**cours de soutien**), me contacter par courriel.

Je cherche deux volontaires pour être délégués des élèves !